

# Radu Vâlceanu - fondatorul Școlii Timișorene de Chimie a Compușilor Elementorganici (Radu Vâlceanu - founder of the Elementorganic Chemistry School in Timișoara)

ADRIAN ȘTEFAN CHIRIAC<sup>a\*</sup>, ZENO SIMON<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Universitatea de Vest din Timișoara, Facultatea de Chimie, Biologie, Geografie

<sup>b</sup>Institutul de Chimie al Academiei Române din Timișoara

---

Radu Vâlceanu, born in 1927, finished his education in chemistry in Polytechnic Institute in Timișoara, in 1954. A brilliant chemist and organizer, he had a first rank role in the creation, in Timișoara, of the Research Centre in Chemistry of the Romanian Academy with a very modern research profile. In short time the phosphororganic research line of Timișoara acquired an excellent international visibility. Also, he had an important role in starting studies on quantitative structure-biological activity relations. Radu Vâlceanu disappeared prematurely in a car accident but the modern research lines he introduced continued, even in these years, by his former Phd students and younger collaborators.

*Keywords:* Elementorganic compounds, Phosphororganic compounds, QSAR, anticholinesterasic activity, MTD-method, Radu Vâlceanu

---

## Succintă prezentare biografică

Radu Vâlceanu s-a născut la 9 octombrie 1923, în comuna Bibești, județul Gorj. S-a stins din viață în urma unui groaznic accident auto, pe data de 8 mai 1996. A urmat școala primară în comuna natală și liceul militar „D. A. Sturza” din Craiova. La terminarea Liceului Militar din Craiova, în 1942, ca șef de promoție, a fost printre cei selecționați în grupa de elită a ofițerilor români care, în condițiile angajamentelor militare ale statului român și ale stării de război, a fost trimis în Germania pentru instruire specifică pentru posturile de comandă. După încheierea războiului, Radu Vâlceanu a revenit în țară, decis să își realizeze pregătirea profesională, să trăiască și să muncească în patrie [1,2]. Anii de război, în care a fost obligat să suporte rigorile uniforme și consecințele angajamentelor militare ale României în condițiile conjuncturale ale celui de-al Doilea Război Mondial, l-au marcat și i-au adus necazuri, dar, prin tot ce l-a definit și a dovedit prin competența profesională, disciplină și rigoare atât în cariera profesională și în cercetarea științifică, cât și în activitatea managerială, Radu Vâlceanu a adus contribuții importante la dezvoltarea chimiei și industriei chimice românești.

A studiat la Facultatea de Chimie Industrială a Institutului Politehnic din Timișoara pe care a absolvit-o în anul 1954, în specialitatea „chimia compușilor macromoleculari”, ca șef de promoție. A făcut parte din primele generații de absolvenți eminenți ai Facultății de Inginerie Chimică din orașul de pe Bega, fiind unul dintre cei care au pus bazele și au dezvoltat, alături de ctitorii I. G. Murgulescu și C. Drăgulescu, chimia modernă timișoreană și o valoroasă școală de ingineri pentru industria chimică românească. În noile instituții înființate, Facultatea de Chimie (1948) și Baza de Cercetări Științifice (1951), create prin strădaniile neprecupețite ale profesorilor și mentorilor Ilie Murgulescu și Coriolan Drăgulescu [3,7], Radu Vâlceanu și tinerii săi colegi de generație au contribuit la construirea noilor laboratoare și dotarea acestora pentru lucrările practice și cercetările experimentale.

În anul 1954, Radu Vâlceanu a fost angajat prin concurs ca cercetător la Baza de Cercetări Științifice a Academiei din Timișoara. Se încadrează în colectivul de cercetare în domeniul coloranților și al intermediarilor de sinteză aflat sub conducerea profesorului Josif Reichel, care i-a fost și conducător al tezei de doctorat „Reacții de condensare catalizate de clorura de aluminiu solubilizată cu nitrometan” (1963) [8,9]. Începând din acel an, a promovat prin

concurs toate gradațiile de cercetător până la cercetător științific principal I.

În perioada 1968-1969, a efectuat stagii de lucru în domeniul compușilor organofosforici la Sorbona, în laboratoarele profesorului Henri Normant și în domeniul compușilor organici ai fluorului la Universitatea din Bochum, cu profesorul Alois Haas.

Începând din 1960, în paralel cu activitatea de cercetare de la Centrul de Chimie a desfășurat și o activitate didactică în cadrul Politehnicii și la Universitatea din Timișoara (1964-1999). A predat cursuri în specialitatea Tehnologie Organică, la disciplinele chimie organică, sinteze și tehnologii moderne consacrate compușilor fosforului și ai fluorului, tehnologii moderne ale antidăunătorilor ș.a. A îndrumat lucrări practice și proiecte de an, elaborarea lucrărilor de licență și a proiectelor de diplomă (peste 40) la ambele institute de învățământ superior timișorene. Împreună cu Remus Nuțiu și Alexandru Târnoveanu de la Universitatea de Vest din Timișoara a redactat și a publicat una din primele culegeri de probleme de chimie organică în literatura de specialitate din România.

Timp de 27 de ani, în calitate de secretar științific (1963-1977) și apoi de director al Centrului de Chimie din Timișoara, Radu Vâlceanu s-a dovedit a fi un manager competent și eficient prin politica sa de cercetare științifică, pe care a dezvoltat-o răspunzând cerințelor momentului de a valorifica rezultatele cercetărilor în unități de producție. A inițiat cercetări în premieră, în Timișoara, în domeniul compușilor element-organici. A sprijinit dezvoltarea în România a cercetării în domenii noi, moderne, precum chimie cuantică și QSAR. A coordonat logistic programele de cercetare ale celorlalte colective ale Institutului de Chimie timișorean. Ca urmare, s-a bucurat de totală încredere a Academicianului Coriolan Drăgulescu, ctitorul chimiei timișorene, pe care îl considera acel „factotum” indispensabil pentru afirmarea și consolidarea prestigiului științific al acestei instituții de cercetare. După decesul Academicianului Coriolan Drăgulescu (1977) a preluat funcția de director, asumându-și o uriașă responsabilitate. Eforturile sale au fost concentrate pentru a asigura continuitatea tuturor activităților, în momente critice, până la limita de supraviețuire, în acea perioadă, când cercetarea chimică românească a fost în subordonarea totală a ICECHIM-ului, obligată fiind să suporte constrângeri și privațiuni, care decurgeau din ordine și cerințe absurde. S-a ajuns la situații cvasiimposibile: rentabilizarea cu orice preț a cercetării, dirijată spre instalații de producție semiindustriale cu obligația de a elimina importurile. Sursele de informare și documentare științifică au

fost reduse aproape total. Salariile erau condiționate de autofinanțare și ca urmare, cheltuielile pentru dotarea și modernizarea laboratoarelor a fost sistată, schema de personal a fost redusă. Cu multă strădanie, dar și cu un curaj deosebit, Radu Vâlceanu a reușit să facă față situațiilor de criză create.

După 1990, Radu Vâlceanu s-a implicat în reorganizarea institutului, reabilitarea cercetării fundamentale, orientarea cercetărilor și susținerea lor spre direcții prioritare la nivelul științei internaționale. În același timp, a fost preocupat și a participat activ la formarea specialiștilor din generația tânără, cărora le acordă tot sprijinul (studii de licență, de masterat și postdoctorale, stagii de pregătire și colaborări cu parteneri externi). Urmare a demersurilor personale, biblioteca institutului și-a completat fondul documentar cu o serie de enciclopedii și cărți fundamentale, cu colecții de reviste indispensabile pentru informarea științifică în domeniul chimiei; de exemplu, Chemical Abstracts, Nature, Phosphorus, Phosphorus and Sulfur, J. Amer. Chem. Soc. ș.a.

La 8 mai 1996, după participarea la conferința dedicată reformelor necesare pentru învățământul superior de chimie și cercetarea științifică din perspectiva integrării europene, Radu Vâlceanu a suferit un tragic accident mortal. Au rămas neîmplinite proiecte pe care le-am dezbătut împreună, cu multe speranțe de împlinire, care vizau concentrarea și coordonarea unitară a activităților din învățământul superior și cercetarea științifică de chimie timișeană, așa cum, cu decenii în urmă, se străduise să realizeze Academicianul Coriolan Drăgulescu [6].

### Opera științifică [3, 4, 6, 7]

După susținerea tezei de doctorat, Radu Vâlceanu și-a orientat cercetările spre fabricarea produselor intermediare pentru obținerea coloranților antrachinonici. Rezultatele au condus la determinarea condițiilor avantajoase de obținere a unor combinații trifenilmetanice cu randamente de reacție mari (brevetate), intermediari pentru fabricarea unor coloranți rezistenți pentru fibre sintetice [3, 6, 9, 10].

După stagiile de lucru în Franța și Germania, efectuate la Universitățile Sorbona și din Bochum (1968-1969), Radu Vâlceanu și-a orientat cercetările în domeniul compușilor organici ai fosforului și ai fluorului. În scurt timp, a reușit să constituie un colectiv de tineri cercetători foarte valoroși, format din chimiști și ingineri chimiști, capabil să abordeze și să finalizeze studii fundamentale și cu caracter tehnologic-aplicativ, menținând o abordare echili-

brată în relația știință-tehnologie pe direcțiile de cercetare privind: sinteza, metodele de analiză, studiul proprietăților caracteristice, structura și reactivitatea compușilor organici ai fosforului din importante clase de derivați funcționali: fosfiți, fosfați, fosfinați, compuși cuaternari de fosfoniu și heterocicli cu heteroatom de P, intermediari cu fosfor și cu fluor în molecule de substanțe cu aplicații importante. Din 1968, în cadrul Bazei de Cercetări Științifice a Academiei Române, la inițiativa lui Radu Vâlceanu, a luat ființă Secția de Chimie a Compușilor Element-Organici. Susținut de Dănilă Purdela și de Gheorghe Ilia, împreună cu un nucleu de cercetători tineri foarte capabili și pasionați, a dezvoltat, prioritar, pe plan național, Școala de chimie organică a fosforului din Timișoara. Rezultatele cercetărilor din perioada 1954-1993 au fost valorificate prin 88 de lucrări științifice publicate în reviste din țară și străinătate cu mare vizibilitate; 44 dintre ele au apărut în reviste precum *Nature*, *Ind. Engng. Chem.*, *J. Chromatogr.*, *Phosphorus*, *Revue Roumaine de Chimie*, *Revue Roumaine de Biochimie*, *Pure and Applied Chemistry*, *Phosphorus*, *Phosphorus and Sulfur*, *Naturwissenschaften*, *Z. anorg. allg. Chem.*, *Studia Biophysica*, *J. Therm. Analysis* ș.a. [11-15]. S-au adăugat 97 de brevete de invenții și 37 procese tehnologice originale, care și-au găsit aplicarea prin proiectarea și amenajarea unor importante instalații funcționale pe platformele industriale de la Bozești și Tg. Mures, pe platforma de piloți din Timișoara [7]. Rezultatele cercetărilor au fost prezentate de Radu Vâlceanu și de colaboratorii săi la diferite conferințe internaționale de profil la Paris (1969), Stockholm (1971), Barcelona (1996), Kazan (1966).

În 1965, Academicianul Ilie Murgulescu, puternic legat afectiv de Timișoara, unde timp de 16 ani (1933-1949) a fost cadru didactic și rector al Institutului Politehnic din Timișoara, a decis ca din puternicul său nucleu bucureștean de cercetare, pe care l-a creat și l-a condus, să trimită în Centrul universitar bănățean pe Zeno Simon, unul dintre tinerii săi colaboratori de mare perspectivă. Misiunea acestuia era să dezvolte o chimie modernă la Timișoara prin cercetare științifică și o activitate academică performantă [16,17]. În 1966, Zeno Simon a fost încadrat conferențiar la disciplina de chimie fizică de la Secția de Fizică-Chimie a Facultății de Fizică din Universitatea Timișoara și angajat cu jumătate de normă la Centrul de Chimie din Timișoara. Directorul acestui centru de cercetări, profesorul Coriolan Drăgulescu și secretarul științific Radu Vâlceanu erau interesați în dezvoltarea chimiei moderne timișorene în noile instituții de învățământ superior, Facultatea de Chimie Industrială (1948),

Universitatea din Timișoara (1962) și la Centrul de Chimie al Academiei (1966), provenit din Secția de chimie a Bazei de Cercetări Științifice (1951). La propunerea directorului și a secretarului științific, s-a înființat un mic grup de cercetare de chimie cuantică, sub conducerea conferențiarului Zeno Simon, care, inițial, s-a axat pe aplicarea metodelor de chimie cuantică la moleculele unor heterocicli cu heteroatom de P având un posibil caracter aromatic [18-21]. Principalii colaboratori au fost Aurel Balint și Mircea Mracec. La primele studii s-a folosit metoda simplă HMO și rezultatele au fost publicate în *Nature* și *Revue Roumaine de Chimie* [19,20], iar, mai târziu, metoda mai avansată Pariser-Parr-Pople [17]. Calculele efectuate au arătat că există o participare puternică și extinsă a mai multor orbitale 3d ale atomului de fosfor pentavalent și trivalent în cicluri de fosfor, formal aromatice. Ele au oferit argumente pentru un alt model al implicării atomului de P în asemenea cicluri, care se deosebea de modelul Fukui și de modelul Dewar, construite pe baza calculelor HMO, care propuneau o interacțiune slabă între atomii de P și C. A rezultat un grup de lucrări care a avut un număr apreciabil de citări în literatura de specialitate [19-21]. Modelele simple elaborate pentru heteroatomul de P în sisteme conjugate de electroni pi au fost citate în literatura de specialitate ca modele Vâlceanu-Simon (C. Mark, *Angewandte Chemie*, 1972, 84, 1066) [7]. Ulterior a fost folosită și metoda Del Re pentru determinări de momente dipol la compuși organofosforici [22]. R. Vâlceanu, A. Chiriac, Z. Simon au aplicat regula Woodward-Hoffmann pentru a studia posibilitatea obținerii și stabilității ciclurilor triatomice cu heteroatom de P și N [23].

O importantă contribuție pentru studiul domeniului chimiei compușilor elementorganici au avut-o cărțile la care Radu Vâlceanu a fost coautor: „Chimia compușilor organici ai fosforului și ai acizilor lui” [24], tradusă în limba rusă sub redacția reputatului om de știință M. I. Kabachnik, și „Utilizarea bioregulatorilor în producția vegetală” [25].

Colaborarea cu Zeno Simon l-a determinat pe Radu Vâlceanu să propună valorificarea experienței pe care acesta a acumulat-o prin studiul interacțiilor specifice în sisteme biologice, bazate pe complementaritatea dintre „efector” și „receptor”. Radu Vâlceanu a inițiat și a fost principal animator pentru un nou domeniu de cercetare din deceniul al 7-lea al secolului trecut - relații cantitative între structura chimică și activitatea biologică (QSAR) - în diferite clase de compuși chimici. S-a elaborat o strategie de cercetare, care să evalueze, cât mai fidel și în mod eficient, asemenea corelații, bazate pe date

de activate biologică determinate experimental interpretate cu ajutorul unor teorii și metode ale chimiei teoretice moderne aplicate pentru elucidarea structurii și a reactivității (cuantochimie, stereochemie, interacții specifice între biomolecule ș.a.). Scopul era să ofere criterii pentru selectarea în vederea sintezei structurilor compușilor organofosforici din clasa esterilor acizilor fosforic și tiofosforic, fosforic și tiofosforic (compuși Schrader) cu activitate anticholinesterazică selectivă și eficientă [26-30]. În 1972, au fost realizate primele studii de QSAR, aplicate pentru corelarea toxicității unor derivați ai acidului fosforic, evaluând cantitativ și calitativ, influența unor factori structurali, precum hidrofobicitatea și constantele de substituent cu efect electronic. Inițial, colectivul care a abordat acest domeniu de cercetare a fost alcătuit din Zeno Simon, Radu Vâlceanu, Zoltan Szabadi și Adrian Chiriac. Primele lucrări, în care s-a folosit metoda corelațiilor multiple, au apărut în *Studia Biophysica* și *Revue Roumaine de Chimie*, în anul 1973 [31,32]. În primii ani ai deceniului șapte, grupul de cercetare al lui Hansch și alți cercetători foloseau descriptori structurali consacrați: hidrofobicitatea, constanta de substituent Hammett, volum molecular, refracție moleculară. Nu există, încă, un mod de a cuantifica „potrivirea” spațială din punct de vedere steric a moleculei efector în situsul receptor al enzimei („precum cheia în broască”), care determină, la nivel celular, efectul biologic. Această cerință a primit o primă rezolvare prin elaborarea metodei diferenței sterice minime (MSD) rafinată ulterior topologic în varianta MTD (diferența topologică minimă), publicată în prima lucrare în revista *Studia Biophysica* [33]. În esență, metoda se bazează pe descrierea structurii spațiale a moleculelor efector prin „construirea” unei „hipermolecule” cu rețea tridimensională rezultată prin suprapunerea moleculelor din seria studiată, astfel încât nodurile acestora să corespundă aproximativ cu pozițiile atomilor din moleculele efector, cu atribuirea indicilor de relevanță sterică favorabilă (+), defavorabilă (-1) și neutră (0). Metodele MSD și MTD sunt amplu prezentate și validate prin aplicarea pe variate serii de compuși biologic activi în lucrarea „Minimum Steric Difference ; The MTD for QSAR Studies”, apărută în *Anglia* [34]. În scurt timp, cercetările inițiate de Radu Vâlceanu, fundamentate și dezvoltate de Z. Simon și colaboratorii săi apropiați s-au extins și au cuprins cadre didactice și cercetători la nivel de centru universitar. Anul 1975 poate fi considerat anul în care s-a constituit, fără a fi o structură „legal” constituită (la acea vreme nici nu s-ar fi primit aprobările forurilor diriguitoare!) Grupul de Chimie Cuantică și QSAR. Doctoranzii îndrumați științific de Radu Vâlceanu au realizat un

front larg de cercetare în domeniul chimiei compușilor elementorganici. De exemplu, teza de doctorat “Selectarea unor structuri chimice cu acțiune pesticidă în clasa combinațiilor organofosforice pe baza corelărilor cantitative structură-activitate biologică” elaborată sub îndrumarea științifică a lui Radu Vâlceanu și Zeno Simon se bazează pe 13 lucrări științifice publicate și 9 preprinturi recenzate în *Chemical Abstracts*.

În pofida unor dificultăți majore, acest grup inițial de cercetători entuziaști a reușit să continue cercetările. Alături de „garda veche” s-au integrat Mircea și Maria Mracec (Centrul de Cercetări Chimice), Ion Moțoc, Dan Ciubotariu, Ștefan Holban (Institutul Politehnic Timișoara). Cei menționați au constituit prima generație de QSAR-iști și cuantochimiști, care s-au format și continuat, dezvoltat și performat, în aceste domenii ale chimiei moderne computaționale. În perioada anilor 1977-1997, au fost publicate peste 150 lucrări pentru care s-au identificat 240 de nonautocitări în literatura de specialitate. După 1995, din cele două noi generații, care s-au format, peste 15 chimiști timișoreni au plecat din țară (I. Moțoc, T. Sulea, S. Mureșan, T. I. Oprea, C. Bologa, M. Olah, G. Balea ș.a.). Totuși, alături de „garda veche”, ei au realizat relații active de colaborare și împreună cu cuantochimiști timișoreni au asigurat continuitatea și competitivitatea valorică a Grupului de Chimie Cuantică și QSAR la nivel mondial, timp de patru decenii [17]. Alături de metoda QSAR-3D s-au aplicat metode QSAR moderne, precum CoMFA și LPS. A fost publicat un bilanț al activității, în timp de 4 decenii al Grupului QSAR [35].

Profesorul Radu Vâlceanu s-a implicat cu prioritate, profesional și managerial în cercetări finalizate prin brevete de invenții și procese tehnologice originale în domeniul intermediarilor și compușilor elementorganici, pesticidelor, medicamentelor, auxiliarelor textili, compușilor perfluorați cu acțiune eficientă de stingere. Prin cercetări contractuale, care au condus la proiectarea și amenajarea a numeroase instalații pilot pe platforme industriale și platforma de piloți din Timișoara, s-a asigurat autofinanțarea indispensabilă supraviețuirii Institutului de Chimie, în deceniile 7 și 8 ale secolului trecut. Dintr-o examinare retrospectivă, se impune o foarte serioasă analiză a cauzelor și responsabilizațiilor celor care au dus chimia românească de la „fală la paragină” [3, pg.140-149], dar și la aducerea în memoria celor de astăzi a celor care s-au dedicat dezvoltării chimiei românești.

Radu Vâlceanu a fost unul din pionierii chimiei moderne timișorene, cu o remarcabilă operă științifică, un adevărat manager cu idei și fapte

benefice pentru viața științifică [26-35], a fost un animator al manifestărilor științifice, iar Conferința Națională de Chimie, care a fost organizată de C. Drăgulescu și R.Vâlceanu în 1965, rămâne o referință de succes la nivel național).

Moartea tragică a profesorului Radu Vâlceanu, la 8 mai 1996, a reprezentat o mare pierdere pentru comunitatea științifică a chimiștilor din România.

## Bibliografie

- [1] Petre T. Frangopol, *Ctitorii chimiei timișene: Ilie G.Murgulescu. Coriolan Drăgulescu și Radu Vâlceanu*, Revista de Politica Științei și Scientometrie, **2**(1), 17 (2013).
- [2] Petre T. Frangopol, *Contribution of the chemistry laboratories of Timisoara for History of Romanian Chemistry*, Workshop-Academia Română, Filiala Timișoara, 22-23 mai 2003.
- [3] Petre T. Frangopol, *Radu Vâlceanu (1923-1966) în „Mediocritate și excelență. O radiografie a științei și învățământului din România”*, Ed. Casa Cărții de Știință, Cluj-Napoca, 170-180 (2008).
- [4] Zeno Simon, *Radu Vâlceanu așa cum l-am cunoscut*, Revista Academica, anul XIII, nr.15, 72-73 iunie 2003.
- [5] Petre T. Frangopol, *Chimia românească în „Mediocritate și excelență. O radiografie a științei și învățământului din România”*, Editura ALBATROS, București, 143-146 2002; A. Chiriac, Z. Simon, *Coriolan Drăgulescu ctitor al învățământului și cercetării de chimie în Banat*, Revista de Politica Științei și Scientometrie, Seria Nouă, **2**(1), 52 (2013).
- [6] Septimia Policec, *Institutul de Chimie Timișoara în „Academia Română Filiala Timișoara. Istoric 1951-1999”*, Editura Orizonturi Universitare, Timișoara, 209-214 (1999).
- [7] Otilia Costisor, *Zeno Virgil Simon - membru corespondent al Academiei Române*, în „Academia Română. Filiala Timișoara. Istoric 1951-1999”, Editura Orizonturi Universitare, Timișoara, 322 (1999)
- [8] J. Reichel, *Tehnologia coloranților antrachinonici*, Ed. Academiei RSR, București, 1960; J. Reichel, *Chimia și Tehnologia Coloranților Azoici*, Ed. Academiei RSR, București, 1955
- [9] J. Reichel, R. Vâlceanu, *Contribuții la sinteza acizilor cetonici aromatici (I)*, Studii și Cercetări Științifice a Academiei RSR, Baza Timișoara, 3, 17 (1956); *Contribuții la sinteza acizilor cetonici aromatici (V)*, 5, 35 (1958)
- [10] J. Reichel, R. Vâlceanu, W. Schmidt, *Über die katalytische Kondensation von CCl<sub>4</sub> sckindaren aromatischen Aminen*, Rev. Roum. Chim. **9**, 743 (1964)
- [11] R.Vâlceanu, P. Schultz, R. Drăghici, P. Șoimu, *Zur Gaschromatographie einiger (1-Hydroxi-2,2,2-trichloroathyl)phosphorsäureester*, J. Chromatografie, **82**, (1973).
- [12] R.Vâlceanu, Z. Szabadai, Ileana Neamțiu, Livia Pot, *The Correlation between pI50 and the Structural Characteristic in Some Organophosphorus Derivatives of Acenaphtene*, Studia Biophys.(Berlin), **42**, 135 (1974).
- [13] R.Vâlceanu, V. Eliu, P. Schultz, Z. Szabadai, Doina Ene, Nicoleta Valceanu, *Zur Chemie der Amide Phosphorhaltiger Mineralsäure*, Pure and Applied Chemistry, **44**, 285 (1975).
- [14] R.Vâlceanu, P. Schultz, *Alkaline Hydrolysis of tris- and tetrakis(dimethoxy)phosphazene*, Phosphorus, **6**, 23 (1976).
- [15] R.Vâlceanu, I. Neda, *Synthesis and Conformational Analysis of Some New 5-nitro-2-R-2-oxo-1,3,2-dioxaphosphorinane Derivatives*, Phosphorus and Sulfur, **6**, 577 (1979).
- [16] A.Chiriac, L. Kurunczi, M. Mracec, S. Raduly, Z. Szabadai, *Zeno Simon fondatorul Scolii de Chimie Teoretică la Timișoara*, Revista de Politica Științei și Scientometrie, Vol.4(3) 181 (2015).
- [17] Zeno Simon, *Memoriile chimistului timișorean*, Ed. Marineasa, Timișoara, 2015.
- [18] R.Vâlceanu, A. Balint, Z. Simon, *Molecular orbital calculations for heterocycles with phosphorus (III) trivalent phosphorus*, Anal. Univ. Timișoara, Ser. Mat. Fiz., **6**, 337-344 (1968).
- [19] R.Vâlceanu, A. Balint, Z. Simon, *Huckel molecular orbital calculations for phosphabenzene*, Nature, **217**, 61 (1968)
- [20] R.Vâlceanu, A. Balint, Z. Simon, *Huckel molecular orbital calculations for phosphorus heterocycles (I). Tetracoordinated pentavalent phosphorus phosphabenzene*, Rev. Roum. Chim., **13**, 535 (1968).
- [21] R.Vâlceanu, A. Balint, Z. Simon, C. Renția, C. Unterweger, *HMO calculations in phosphorus heterocycles with pentavalent tetracoordinated P as heteroatom*, Rev. Roum. Chim., **13**, 1516 (1968).
- [22] R.Vâlceanu, Z. Simon, L. Kurunczi, *Quantum chemical calculation for dipole moments of phosphorus compounds*, 34, 377 (1989).

- [23] R. Vâlceanu, Z. Simon, A. Chiriac, *Stability of three-membered heterocycles (I). Considerations concerning thermodynamic stability and conservation of orbital symmetry*, Rev. Roumaine Chim., **34**, 1552 (1973).
- [24] D. Purdela, R. Vâlceanu, *Chimia compușilor organici ai fosforului și ai acizilor lui*, Ed. Academiei RSR, București, 1965: Ed. Khymia, Moscova (1973).
- [25] R. Vâlceanu, M. Goian, A. Gherghel, *Utilizarea bioregulatorilor în producția vegetală*, Ed. FACLA, Timișoara, 1988.
- [26] R. Vâlceanu, A. Chiriac, Z. Szabadai, Z. Simon, *Multiple Correlations in the Anticholinesterasic Activity of Organic Phosphorus Compounds*, Rev. Roumaine Chim., **10**, 239, 239 (1973).
- [27] A. Chiriac, Veronica Chiriac, R. Vâlceanu, *Quantitative Structure-Activity Relation for Vinyl-Phosphates by the Free-Wilson Method*, Analele Univ. Timișoara, Ser. Fiz. Chim., **11**(2), 67 (1973).
- [28] A. Chiriac, Veronica Chiriac, Z. Simon, R. Vâlceanu, *The MSD parameter in structure-activity correlations for series of organophosphoric compounds with anticholinesterasic action*, Analele Univ. Timișoara, Ser. Fiz. Chim., **21**, 355 (1976).
- [29] A. Chiriac, Z. Simon, R. Vâlceanu, *Structure-biological activity correlations in phosphororganic compounds. Role of electric charge and other parameters for acetylcholinesterase inhibition*, Studia Biophys. (Berlin) **51**, 183 (1975).
- [30] A. Chiriac, D. Ciubotariu, Z. Szabadai, R. Vâlceanu, Z. Simon, *Structure-activity correlations in phenyl-methyl-carbamates. In vitro anticholinesterasic activity*, Rev. Roum. Biochim. **12**, 143 (1975).
- [31] R. Vâlceanu, A. Chiriac, Z. Szabadai, Z. Simon, *Multiple Correlations in the Anticholinesterasic Activity of Organic Phosphorus Compounds*, Rev. Roumaine Chim. **10**, 239 (1973).
- [32] Z. Simon, Z. Szabadi, *Minimal steric difference parameter and the importance of steric fit for structure-biological activity correlations*, Studia Biophys. (Berlin) **39**, 123 (1973).
- [33] R. Vâlceanu, Z. Szabadai, A. Chiriac, Z. Simon, *Multiple structure-toxicity correlation of organic phosphorus compounds*, Studia Biophys. (Berlin) **34**, 1 (1972).
- [34] Z. Simon, A. Chiriac, S. Holban, D. Ciubotariu, G. I. Mihalaș, „*Minimum Steric Difference. The Method for QSAR Studies*”, Res. Stud. Press Ltd. (John Wiley) Letchworth, Herts (Anglia), 1984).
- [35] A. Chiriac, D. Ciubotariu, Simona Funar-Timofei, L. Kurunczi, M. Mracec, Maria Mracec, Z. Szabadai, E. Seclaman, Z. Simon, *QSAR and 3D-QSAR in Timișoara, 1975-2005*, Rev. Roum. Chim., **51**, 79 (2006).